

响应来源与规范化的适用边界

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / 已确认的结果

已取得全部九份 JARVIS OPTIMADE 响应体，其 SHA-256 与原始快照中保存的摘要完全一致。采用精确十进制及类型敏感比较，全部49条记录与快照一致。成分元数据的不一致已存在于这些响应中，并非由本次核查的导出过程引入。

核查项目	结果
与保留摘要一致的响应	9 / 9
与快照一致的记录	49 / 49
与 XML 字段一致的试点通道	3 / 3
已取得并验证的原始计算文件	0
新模块测试	28项通过
历史阻塞项 / 已解除	37 / 0

相对于前一检查点的进展

B3.1 发现了成分元数据的不一致。B3.2 固定了导出程序并检验其机制，但未取得响应体。B3.3 根据保留的摘要补齐响应内容，并取得 JVASP-114724 本身的公开 XML。未使用 JVASP-13829 替代试点记录。

摘要一致的含义

在 SHA-256 通常的抗碰撞假设下，恢复的内容与保留摘要相绑定。下载发生于9月20日；历史日期、摘要承诺本身的来源及当时实际执行的程序版本仍未得到独立认证。尚未定位提供方内部产生不一致的具体原因。

原始快照与完整的 B3.2 归档逐字节保持不变。另行生成的派生数据标记为 QUARANTINED_NOT_ADMITTED。本次核查并非对整个 API 的 OPTIMADE 合规认证。[S1, S2]

02 / 规范化：定义与证明

定义域仅包括完全占据的单元素位点，要求化学符号已知，且 species_at_sites、nsites 与化学式一致。混合占据、未知位点种类或化学式冲突均导致拒绝处理。不证明原始几何结构在物理上的正确性。

```
E = sort(unique(sites)); c(e) = number of sites labelled e; n = sum c(e).  
  
N(x): elements := E; nelements := |E|; elements_ratios := [c(e)/n for e in E].
```

其他字段原样复制。JSON 中的比例采用浮点数；精确有理数 $c(e)/n$ 保存在变更日志中。因此，该操作只相对于给定的位点描述修正元数据，不产生新的化学知识。

命题一：幂等性

$N(N(x)) = N(x)$ 。变换不改变位点数据，因此再次应用时 E、c 和 n 均不变。元素排序与有理数到 JSON 的转换规则是确定性的，三项赋值产生相同结果。

命题二：保持性与借助日志的可逆性

令 $A = \{\text{elements}, \text{nelements}, \text{elements_ratios}\}$ ，则 A 以外的投影满足 $P(\text{not } A)(N(x)) = P(\text{not } A)(x)$ 。日志 J(x) 保存 A 的旧值、新值及记录摘要。校验摘要后， $R(N(x), J(x)) = x$ 对已解析的 JSON 记录严格成立。原始字节另行保留，不声称能够从解析结果恢复原始 JSON 排版。

N 本身不可逆：位点相同而错误元数据不同的输入可能得到同一输出。日志仅恢复已固定的输入与输出对。这是有条件的软件命题，不是 KLT 模型成立的证明。

变更字段	记录数
elements	49
nelements	49
elements_ratios	43
字段替换总数	141

全部49条原始记录都存在三类不一致。六条记录的比例数组已与最终数组一致，修正前两个字段后无需替换比例。派生数据通过了限定范围的成分核查、重复应用及恢复检验。训练仍然关闭。

03 / 试点档案：JVASP-114724

已取得同一记录及相标签的提供方 XML。三个数值分别按精确路径核对一致。公开字段的一致性将通道绑定至提供方记录，但不验证完整计算上下文。公开档案不包含性质数值及坐标。[S3]

#11 • DFT-OptB88vdW

/basic_info/main_relax_info/scf_indir_gap

OPTIMADE: _jarvis_optb88vdw_bandgap

#12 • DFT-TBmBJ

/basic_info/main_optics_mbj/main_optics_mbj_info/opto_indir_gap

OPTIMADE: _jarvis_mbj_bandgap

#13 • DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk

/basic_info/main_elastic/main_elastic_info/voigt_bulk_modulus

OPTIMADE: _jarvis_bulk_modulus_kv

嵌入的 CONTCAR 表示

嵌入的 CONTCAR 文本包含晶胞和五个位点。在单位缩放及笛卡尔坐标条件下，晶胞与带元素标签的位置多重集合在精确十进制运算下完全一致。允许同元素位点重排以及 $-0 = 0$ 。未进行对称性搜索或一般晶胞变换。[S5]

提取文本明确标记为 XML 中嵌入的表示。它既未被认证为原始计算文件，也不是独立生成的 KLT 结构。元素标签不能证明实际使用了哪些赝势。

收敛信息

XML 包含 k 参数序列的11个点、截断参数序列的6个点，以及提供方声明的收敛设置。已检验序列形状；收敛判据、这些序列与各通道的对应关系及完整计算协议仍未确认。未运行 DFT 计算。

04 / 复现与下一检查点

新采集程序在解析之前保存 HTTP 响应体，包括完整的错误响应。凭据记录 URL、状态码、大小、SHA-256、本地时间及采集程序摘要。保存的是在 Accept-Encoding: identity 下取得的 HTTP 载荷字节，而不是 TLS 线路抓包或独立时间戳。

新模块通过28项测试，其中20项使用合成数据，8项使用固定的研究输入。覆盖字节替换、重复 JSON 键、数值与类型精度、不完整响应、越界字段修改、恢复、幂等性、独立 XML 通道及禁止状态升级。公开包明确跳过8项需要私有输入的测试。本检查点未重新运行历史核心的120项测试；核心保存在父归档中。

使用条件

已保存 Terms of Use 页面，但尚未确定适用于固定快照的许可证标识。这不表示提供方没有相关权利。公开包包含代码、合成示例及审计元数据；响应体、坐标、性质数值和派生数据仅保存在研究包中。[S4]

CP2B-B3.4: 仍需取得的证据

1. 各通道的计算协议、INCAR、KPOINTS、赝势标识或校验和、OUTCAR/vasprun 或等效可验证证据。2. 特定数据适用的使用条件。3. 独立构建 KLT 结构并验证其与材料结构的对应关系。4. 此后才重新评估准入。训练及真实数据预测继续关闭。

37项历史阻塞全部保留，解除0项。新增 KLT 对应关系0项，原始数据修改0项。science=ABSTAIN；DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED；EXT-RUN=NOT_RUN；truth_layer_promotion=0；T6-RA5=NOT_ISSUED；axiom_promotion=DISABLED。physical_reachability=NOT_ESTABLISHED；parameter_identification=NOT_PERFORMED。

S1 • [JARVIS OPTIMADE](#) • [structures](#)

S2 • [OPTIMADE 1.1.0](#) • [specification](#)

S3 • [NIST JARVIS](#) • [JVASP-114724 XML](#)

S4 • [JARVIS](#) • [Terms of Use](#)

S5 • [VASP Wiki](#) • [POSCAR / CONTCAR](#)